

## 적층복합재료의 굽힘 파괴거동에 관한

### 준분자동력학적 해석

\*박준영(경북대원), 김영석(경북대)

## Quasimolecular Dynamics Simulation for Bending Fracture Propagation of Laminar Composite Material

Jun-Young Park, Young-Suk Kim

Department of Mechanical Engineering

Kyungpook National University, Taegu, 702-701

### Abstract

Recently, quasimolecular dynamics has been successfully used to simulate the deformation characteristic of actual size material. In quasimolecular dynamics, which is an attempt to bridge the gap between atomistic and continuum simulations, molecules are aggregated into large units, called quasimolecules, to simulate the large scale material behavior.

In this paper, a numerical simulation using quasimolecular dynamics has been performed to investigate the laminar composite material fracture and crack propagation behaviors in bending process of laminar composite material which is made of fictitious materials. The simulation of the bending of laminar composite material has clarified the effects of strength of material at outer surface upon the fracture behaviors of the specimen

Key Words : Quasimolecular Dynamics, Bending Fracture, Laminar Composite

### 1. 서 론

최근, 물질을 구성하는 기본 입자인 분자들간의 힘의 상호작용을 취급하는 분자동력학(Molecular Dynamics : MD)을 이용하여 원자·분자레벨 관점에서 미세크랙의 발생, 전파에 의한 재료의 파괴과정을 컴퓨터 시뮬레이션 하여 재료의 궁극적인 파괴거동을 규명하려는 연구가 시도되고 있다.<sup>[1]</sup> 이러한 분자 동력학법에서는 실제 크기의 재료가 천문학적인 숫자의 분자로 구성되었기 때문에 해석이 가능한 재료의 크기는 제한이 되어왔다. 그러나 여러 개의 분자를 모아서 하나의 커다란 가상의 물질인 준분자로 생각하고 이 준분자들간의 힘과 변위관계를 해석하는 준분자동력학(Quasimolecular dynamics : QMD)에 의하면 실제 크기의 재료의 파괴거동의 해석이 가능하다는 것이 일부 보고되고 있다.<sup>[2,3]</sup> 그러나 아직 실제 공학분야에서의 적용은 그리 많지 않은 실정이다.

본 연구에서는 이러한 준분자 동력학법을 이용하여 핵발전소압력용기(RPV)에 많이 쓰이고 있는 적층복합재료의 굽힘변형하에서의 재료의 크랙발생과 전파과정을 해석하였다. 이러한 적층복합재료는 굽힘변형에 의한 파단시에 순수재료와는 다른 파괴 거동을 보이는 것을 나타내었다.

### 2. 기본이론

본 연구에서 대상으로 한 재료는 8cm×19.9186cm 크기의 가상의 재료 1과 재료 2이다. 여기서 재료 1은 순수 구리의 준분자동력학적 힘의 함수에 기반을 두고 가정된 재료이며 재료 2는 재료 1보다 4배의 강도를 가지고 나머지 물성은 재료 1과 같은 재료로 가정되어졌다. 또 여기서는 재료 1과 재료 2의 접합강도가 불안전하다고 가정하여 접합계면에서의 강도는 재료 1의 2배로 가정

하였다. 우선 순수구리의 6-12 LJ 포텐셜함수로부터 유도된 힘의 함수는 다음과 같이 주어진다.<sup>[3]</sup>

$$F(r) = \frac{d\Phi}{dr} = - \frac{8.38840 \times 10^{-2}}{r^7} + \frac{1.866125 \times 10}{r^{13}} \quad (dyn) \quad (1)$$

여기서 r은 두 분자들간의 거리이고 단위는 A(angstrom)이다. 두 준분자사이의 거리가 0.2cm 라고 가정하여 dyne단위인 두 준분자사이의 힘 F의 크기 F를 가정하면 다음과 같다.

$$F(R) = \frac{G}{R^3} + \frac{H}{R^5} \quad (2)$$

여기서, F(0.2)=0인 조건과 에너지보존의 법칙을 이용하여 G와 H를 구하여 식(2)에 대입하면

$$F(R) = - \frac{3.262974315}{R^3} + \frac{0.130518972}{R^5} \quad (3)$$

이 된다.

여기서 정규화 상수를 대입하여 각 구리 준분자의 운동방정식을 구하면<sup>[4]</sup>

$$m \frac{d^2 R_i^*}{dT^2} = \sum \left[ \left( - \frac{1.530099184}{(R_{ij}^*)^3} + \frac{0.979263473}{(R_{ij}^*)^5} \right) \frac{R_{ji}^*}{R_{ij}^*} \right] \quad (4)$$

이 되고 이로부터 가상재료의 운동방정식을 다음과 같이 가정하였고 포텐셜함수는 Fig. 1과 같다.

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 R_i^*}{dT^2} &= \sum \left[ \left( - \frac{1.5}{(R_{ij}^*)^3} + \frac{1.0}{(R_{ij}^*)^5} \right) \frac{R_{ji}^*}{R_{ij}^*} \right] && : \text{재료 1 - 재료 1} \\ m \frac{d^2 R_i^*}{dT^2} &= \sum \left[ \left( - \frac{3.0}{(R_{ij}^*)^3} + \frac{2.0}{(R_{ij}^*)^5} \right) \frac{R_{ji}^*}{R_{ij}^*} \right] && : \text{재료 1 - 재료 2} \\ m \frac{d^2 R_i^*}{dT^2} &= \sum \left[ \left( - \frac{6.0}{(R_{ij}^*)^3} + \frac{4.0}{(R_{ij}^*)^5} \right) \frac{R_{ji}^*}{R_{ij}^*} \right] && : \text{재료 2 - 재료 2} \end{aligned} \quad (5)$$

또, 식(4)와 (5)를 수치해석법으로 풀기 위해서 MD에서 많이 사용되는 Verlet법의 일종인 와도법(leap-frog method)을 사용하였으며, 준분자간의 결합이 깨지는 거리로써는 Ashurst와 Hoover에 의해 제안된  $dF/dR^*$ 가 최초로 음이 되는  $R^*$ , 즉,  $R^*=1.06667$ 을 택하였다.<sup>[5,6,7]</sup>

### 3. 굽힘변형 해석모델

Fig. 2에서와 같은 배치를 가진 재료에 굽힘변형시 인장을 받는 볼록면에서 크랙을 유발시키기 위해서 볼록면에 V-형 노치를 부여하였으며 상단보다 하단의 재료가 강도가 강한 경우(모델2), 그 역인 경우(모델3)와 동일재료인 경우(모델1)에 대해서 고찰하였다.<sup>[8]</sup> 시편의 크기는 8cm × 19.9186cm로 1 : 2.5의 종횡 비를 갖는 것으로 하였다. 복합재료인 경우 물질 1(Fig. 5의 상부)과 물질 2(Fig. 5의 하부)의 두께비는 4 : 1로써 적층복합재료인 보통의 크래드강(clad steel)과 같은 두께비를 가지도록 하였다. 경계조건으로는 양쪽 끝단에 있는 분자들을 일정시간 동안에 일정각도 만큼 회전시키는 일정변위 경계조건을 사용하였다. 회전각  $\theta$ 는 수직선으로부터 양쪽 끝단의 준분자들까지의 각도로 정의하며  $d\theta/dT=0.1 \text{ deg/time}$ 의 각속도를 갖는다. 한편 순수굽힘조건을 만들기 위해 시편의 중앙을 지나는 횡선(중립축에 해당)을 일정한 길이로 유지시켰다. 중립축길이의 반을 l로 표시하면 순수굽힘 변형을 위한 양끝단 분자들의 변형후 위치는

$$\begin{bmatrix} X' \\ Y' \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} - D = \begin{bmatrix} \sin \Delta\theta & \cos \Delta\theta \\ \cos \Delta\theta & -\sin \Delta\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} - \frac{l}{\Delta\theta} \cdot \begin{bmatrix} \Delta\theta - \sin \Delta\theta \\ 1 - \cos \Delta\theta \end{bmatrix} \quad (6)$$

와 같이 된다. 식(6)의 첫 번째 항의 Q는 좌표의 회전을 나타내는 행렬이고, 두 번째 항의 D는 중립축이 회전각에 따르는 곡률반경을 갖기 위한 행렬이다.

### 4. 해석결과

Fig. 3과 4는 모델 1로써 단일 재료의 18°와 22°의 변형된 형상과 균열의 전파형태를 보여주고 있다. Fig. 3의 직전단계인 17°까지는 순수굽힘변형이 일어나지만 18°에서 굽힘변형에 의해 큰 인

장력을 받고 있는 볼록면의 V-노치부 선단에서 처음으로 균열이 발생한다. 즉,  $\theta=18^\circ$ 에서 처음으로 준분자간의 결합이 깨져서 균열이 발생되고 있음을 알 수 있다. 특히 균열은 중립축의 직각방향과 그로부터 약  $45^\circ$  기울어진 방향으로 진행하려는 것이 보여지고 있다. 이런 현상들은 굽힘현상중에 되풀이되어 결국 거친파단면을 형성하게된다.  $\theta=22^\circ$ 인 Fig. 4에서는 균열이 시편의 중앙부 깊숙이까지 전파되어졌고 하나의 균열은 중립축에 직각방향으로 다른 하나는 이와  $45^\circ$  방향으로 전파되어지는 것을 보여주고 있다. 또 압축력을 받게되는 시편의 오목한 면에서는 준분자들이 밀부분으로 밀려 나와 압축불안정(compressive bifurcation)현상이 발생하고 있음을 알 수 있다. 이것은 실제재료의 굽힘변형 실험에서 얻어지는 결과와도 잘 일치하고 있다. 또한 압축소성불안정부분이 형성되고 난후 균열의 진전속도가 떨어지는 것도 관찰되어졌다.

Fig. 5와 6은 모델 2로써 하부재료가 상부재료보다 강도가 더 큰 경우이다. 이 경우  $\theta=16^\circ$ 인 Fig. 5에서 처음으로 균열이 발생되어진다. 여기서는 단일재료인 경우보다 균열이 먼저 발생되어지는데 이것은 하단부의 재료 2의 강도에 의한 영향으로 여겨진다. 즉, 재료 2의 영향에 의해서 하단부쪽으로 중립축이 이동되어져 볼록면의 가장 상단부에 모델 1의 경우보다 더 많은 모멘트가 작용되어져 빨리 균열이 발생되어진다. 하지만 균열의 전파형식은 모델 1의 경우와 비슷한 것으로 관찰되었다. Fig. 6은  $\theta=18^\circ$ 인 상태이다. 예상되는 바와 같이 단일재료의  $18^\circ$ 와는 달리 균열이 시편의 중앙부까지 깊숙이 전파되어졌으며 또한 2방향으로 갈라지려는 경향을 가지고 있다. 하지만 단일재료의 균열이 깊숙이 진행되어진 상태인 Fig. 4와는 달리 하단부에 압축불안정현상이 일어나지 않고 있음을 볼 수 있다.

Fig. 7과 Fig. 8은 모델 3으로써 상부재료가 하부재료보다 강도가 더 큰 경우이다. Fig. 7은  $\theta=21^\circ$ 에서 처음으로 균열이 발생되고 있음을 나타낸다. 모델 3의 경우에는  $\theta=20^\circ$ 까지 균열이 발생하지 않고 변형을 하다가 갑자기 균열이 발생되어 한번에 깊숙이 크랙이 진행되고 있다. 이것에 의해서 약  $1^\circ$ 사이에 균열이 재료 2를 통과해서 재료 1까지 다다르게 된다. 이것은 바깥쪽에 강도가 큰 재료가 존재하는 적층복합재료의 굽힘변형실험에서 얻어지는 균열의 전파거동과 잘 일치한다. 하지만 이 경우에 재료 1에서는 균열이 전파되어지기 전에 이미 굽힘그립 부근에서 균열방향으로 슬립에 의해 안쪽에 압축력을 받는 준분자들이 밀려서 내려오는 현상이 발생한다. 이것은 모델 1과 2에서는 볼 수 없었던 현상으로 모델 2와 반대로 시편의 중립축이 위쪽으로 올라가서 시편의 하단부가 모델 1보다는 더 많은 압축모멘트를 받아 생기는 현상으로 생각된다. 그러나 모델 2의 경우에는 하단부에 존재하는 재료 2가 이러한 슬립을 막고 있어서 발생하지 않는다. Fig. 8의  $\theta=22^\circ$ 에서는 균열이 이미 많이 진전된 상태를 나타낸다. 모델3의 경우는 다른 모델들과 달리 파괴가 발생한 후에 재료 내부에 상당히 많은 결합이 발생되고 있음을 볼 수 있다. 이러한 현상은 재료가 변형을 계속할수록 심해지게 된다.

## 5. 결 론

이상의 결과에서처럼 준분자 동력학법은 기존의 유한요소법처럼 연속체 모델을 사용하는 것이 아니고 분할(discrete)모델을 써서 해석하며 기존의 분자 동력학법으로는 해석할 수 없었던  $10^{-2}m$  단위의 모델에 대한 해석이 가능하였다.

본 연구에서는 준분자동력학을 이용하여 적층복합재에 대한 굽힘변형해석을 통해서 복합재의 균열발생과 전파과정을 파악하였다. 이로부터 복합재에서의 적층순서에 따라서는 균열의 발생과 재료내부에 생성되는 결합에 대한 영향을 해석할 수 있었다. 이상의 본 연구로부터 굽힘변형을 받는 경우에 복합재료의 적층순서에 따라 파괴가 일어나지 않고 더 많은 하중을 지지할 수 있는 재료가 볼록면에 존재하는 복합재료가 균열 발생시 더 급격하게 진전되고 더 많은 결합을 포함하여 더욱 위험한 것으로 결론지을 수 있다.

## 참고문헌

- [1] Celis B.de, Argon A.S., and Yip S., J.Appl.Phys.,54,4864(1983)
- [2] Greenspan D., Comput.Struct., 22,1055 (1986)

- [3] Greenspan D., J.Phys.Chem.Sol.50,No.12, 1245(1989)
- [4] 최덕기, 류한규, 대한기계학회 춘계학술대회 강연논문집 A, 102 (1996)
- [5] Greenspan D., Quasimolecular Modeling, World Scientific(1989)
- [6] Hockney R.W., Methods Comput. Phys., 9, 135, (1970)
- [7] Ashurst W.T. and Hoover W.G., Phys.Rev. B14,1465(1976)
- [8] 박준영, 김영석, 한국자동차공학회 추계학술대회 강연논문집 I, 224,(1996)

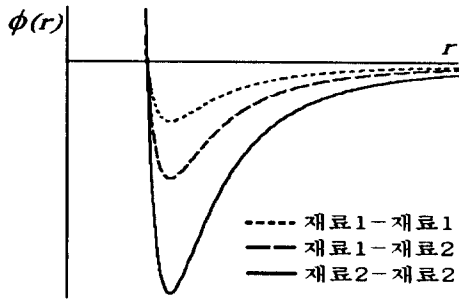


Fig. 1 Potential function of each material

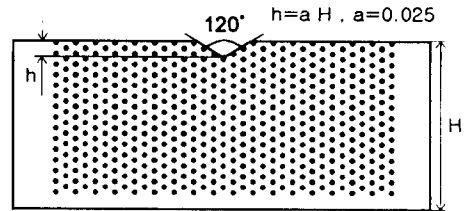


Fig. 2 Notch shape on the material

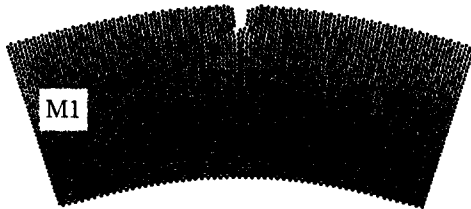


Fig. 3 Deformed shape at 18°(Model 1)

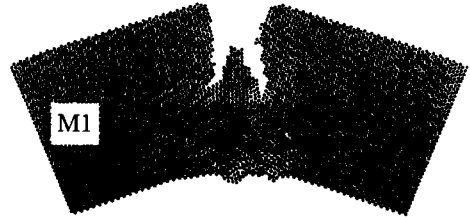


Fig. 4 Deformed shape at 22°(Model 1)

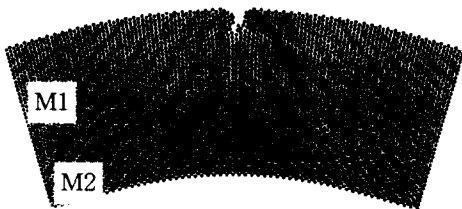


Fig. 5 Deformed shape at 16°(Model 2)

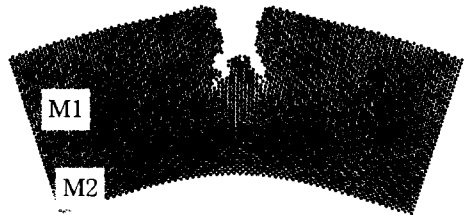


Fig. 6 Deformed shape at 18°(Model 2)

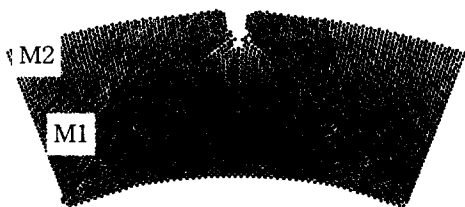


Fig. 7 Deformed shape at 21°(Model 3)

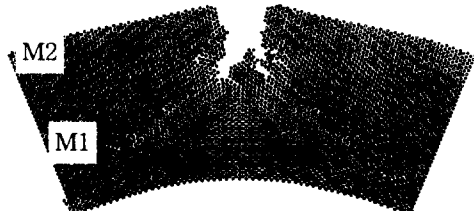


Fig. 8 Deformed shape at 22°(Model 3)